

UNIVERSITÄT ROSTOCK

Dr. Vladimir N. Emel'yanenko

Fachbereich Chemie

Institut für Physikalische Chemie Fax: +49-381-498-6501

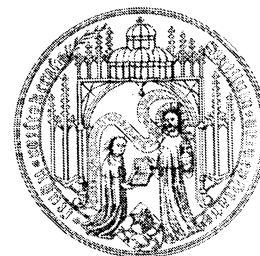
Dr.Lorenz-Weg, 1 Tel :+49-381-498-6499

18059 Rostock, Germany vladimir.yemelyanenko@uni-rostock.de

Universität Rostock

Institut für Chemie

18051 Rostock



ФГБОУ ВПО «Тверской государственный университет»
Ученому секретарю диссертационного совета Д 212.263.02
кандидат химических наук, доценту
Феофановой М.А.
170002, г. Тверь, Садовый переулок, 35

Германия, Росток, 20.05.2014

Отзыв

по диссертации «Создание и применение квантовомеханической модели расчета
термодинамических свойств веществ в широком интервале температур»
на соискание учёной степени доктора физико-математических наук

по специальности

02.00.04 - физическая химия

Туровцев Владимир Владимирович

Представленная на соискание учёной степени доктора физико-математических наук диссертационная работа является крупным вкладом в развитие одного из быстроразвивающихся в настоящее время направлений физической химии – квантово-механических расчетов свойств. Несмотря на то, что расчетные процедуры, использующие аппарат статистической физики и квантовой механики применяются исследователями уже более 100 лет, только в последние десятилетия представилась возможность оценивать величины термодинамических свойств органических соединений с «термодинамической точностью». Тем не менее, для некоторых объектов исследований физической химии, в частности радикалов, вышеуказанная возможность реализуется не в полной мере. Это связано не только с незначительным (в сопоставлении с «обычными» органическими соединениями) количеством экспериментально полученных термодинамических данных свойств радикалов, но и с теоретическими проблемами, возникающими при использовании корреляций «строение-свойство».


Необходимость в величинах термодинамических свойствах радикалов различного строения для моделирования, оптимизации быстротекущих и

высокотемпературных процессов (сгорание, взрывы и т.д.) указывает на актуальность представленной диссертации. Используемые методы исследований являются наиболее перспективными на настоящее время и представляются обоснованными. Проведенные соискателем массовые расчеты термодинамических свойств некоторых рядов органических соединений и радикалов представляют собой практическую ценность. С другой стороны четкие определения понятий «неспаренный электрон», «свободная валентность» и отнесение им в соответствие доли термодинамического свойства рассматриваемого объекта имеет несомненную теоретическую ценность. Наконец, предложенная автором квантовомеханическая модель оценки термодинамических свойств многоатомных веществ в широком интервале температур является новым и крупным вкладом в развитие расчетных методов физической химии и химической физики.

Замечаний по тексту автореферата и содержанию работы нет. Вместе с тем, хотелось бы сделать следующее замечание: как справедливо отмечает соискатель, измерений термодинамических свойств радикалов не так много. Тем не менее, экспериментальное изучение некоторых соединений было выполнено несколько раз, а полученные величины свойств имели различные значения. Из текста автореферата диссертации не ясно, проводил ли соискатель анализ надежности использованных им экспериментальных величин свойств реперных соединений.

На мой взгляд, представленная диссертационная работа содержит новые и уникальные теоретические разработки и результаты, а соискатель Туровцев Владимир Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Кандидат химических наук,
научный сотрудник кафедры физической химии
университета города Ростoka



В.Н. Емельяненко

Universität Rostock
Institut für Chemie
Abt. Physikalische Chemie
Dr.-Lorenz-Weg, 1
18059, Rostock
Tel :+49-381-498-6499
e-mail: vladzimir.yemelyanenko@uni-rostock.de

Universität Rostock
Institut für Chemie
18051 Rostock